

# Peierls 框架与裂纹尖端位错行为

王自强

(中国科学院力学研究所)

## 提 要

本文在 Peierls 框架下对裂纹尖端位错成核与发射问题进行了严格的数学分析。在修正 Rice 设想的基础上,建立了一组新的控制方程。应力场与位错密度场分别表示成第一类与第二类切比雪夫多项式的级数。相应的张开位移与滑错位移可以用三角级数表示。通过离散的方法,控制方程转化为一组非线性代数方程。用 Newton-Raphson 方法求解这组方程,得到远场为纯剪、纯拉及两者复合情况下的解答。计算结果清楚地揭示了裂纹尖端位错成核与发射过程。

关键词: Peierls 框架, 裂纹尖端, 位错行为。

## 0 引言

位错发射的概念在断裂力学中首先由 Rice 和 Thomson<sup>[1]</sup>提出来的。其目的是为了说明材料的韧性与脆性是如何造成的。其后 Ohr<sup>[2]</sup>及其合作者通过大量的薄膜试样透射电镜的在位观察,证实了在已发射的位错与裂纹尖端之间存在着一个无位错区。

Schoeck<sup>[3]</sup>1991年提出,在裂纹尖端,晶体位错有个成核过程。Rice 及其合作者<sup>[4-6]</sup>采纳了 Schoeck<sup>[3]</sup>的观点,对裂纹尖端位错的成核过程及发射临界条件进行了全面分析,提出了不稳堆垛能概念。

本文在 Peierls 框架下,分析了裂纹尖端位错成核与发射过程。采用 Rice 提出的概念,并作了适当修正,建立了一组新的控制方程。用离散的方法,将新的控制方程转化为一组非线性代数方程,用 Newton-Raphson 方法求解。计算结果表明在已发射的晶体位错与裂尖位错成核区之间存在着一个无位错区。

## 1 力学模型

如图1所示,设想裂纹面位于晶体的一个滑移面上,裂纹前缘与滑移方向垂直。讨论二维平面应变问题。

本文收到日期: 1994年5月31日

采纳 Peierls 框架, 设想沿着滑移面滑移方向的分解剪应力  $\tau$  是切位移的周期函数。最简单的是 Frenkel 正弦函数 (如图 2 所示)。我们有:

$$\tau = \tau_{\max} \sin\left(2\pi \frac{\Delta_x}{b}\right) \quad (1)$$

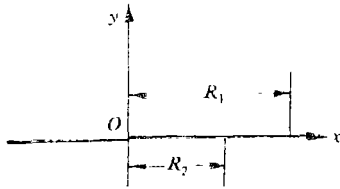


图 1 裂纹顶端的内聚力区(对纯 II 型裂纹,  $R_2=0, R_1=R$ )  
用  $\delta_x$  表示滑移面两侧的滑移量, 则有

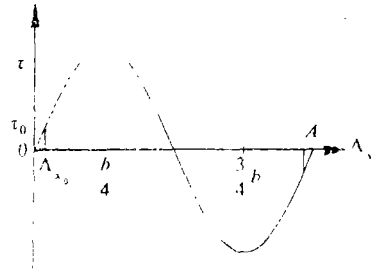


图 2 滑移面上剪应力与剪切位移的关系

$$\Delta_x = \delta_x + \frac{\tau}{\mu} h \quad (2)$$

$h$  是晶面之间的距离。按照晶体塑性理论, 只当剪应力  $\tau$  达到或超过临界剪应力  $\tau_0$  时, 才能产生塑性滑移。因此, 方程 (2) 变为

$$\Delta_x = \begin{cases} \delta_x + \frac{\tau}{\mu} h, & \tau > \tau_0 \\ \frac{\tau}{\mu} h, & \tau \leq \tau_0 \end{cases} \quad (3)$$

类似的对张开位移  $\Delta_y$ , 有:

$$\Delta_y = \begin{cases} \delta_y + \frac{\sigma}{E} h, & \sigma > \sigma_0 \\ \frac{\sigma}{E} h, & \sigma \leq \sigma_0 \end{cases} \quad (4)$$

相应的内聚力关系为<sup>[6]</sup>

$$\sigma = \sigma_{\max} \frac{\Delta_y}{L} e^{-\frac{\Delta_y}{L}} \quad (5)$$

## 2 基本方程

众所周知, Peierls 框架下的刃型晶体位错, 可以看作为沿着滑移面滑移方向无限小弹性位错的连续分布。

先讨论纯 II 型裂纹。塑性区长度用  $R$  表示。按照 Muskhelishvili<sup>[7]</sup>理论, 应力和位移可表示为

$$\begin{cases} \sigma_x + \sigma_y = 2[\Phi(z) + \bar{\Phi}(\bar{z})] \\ \sigma_y - i\tau_{xy} = \Phi(z) + \Omega(\bar{z}) + (z - \bar{z})\Phi'(z) \\ 2\mu(u + iv) = \kappa\Phi(z) + (z - \bar{z})\Phi'(z) - \Omega(\bar{z}) \end{cases} \quad (6)$$

式中:  $\Phi(z), \Omega(z)$  是分区全纯函数; 对平面应变  $\kappa = 3 - 4\nu$ , 对平面应力  $\kappa = \frac{3-\nu}{1+\nu}$ ,  $\nu$  是

Poisson 系数;  $\mu$  是剪切模量。

位于实轴上的位错与半无限裂纹的交互作用可用下述复势函数表示<sup>[8]</sup>:

$$\Phi(z) = \Omega(z) = \frac{\mu}{(\kappa + 1)\pi i} \cdot \frac{b}{(z - z_0)} \sqrt{\frac{z_0}{z}} \quad (7)$$

式中:  $\mathbf{b} = b_x + ib_y$  是弹性刃型位错的 Burgers 矢量。

对位错连续分布, 我们有

$$\Phi(z) = \Omega(z) = \frac{\mu}{(\kappa + 1)\pi i} \int_0^R \frac{\sqrt{\tau} b(\tau)}{\sqrt{z(z - \tau)}} d\tau \quad (8)$$

作用在裂纹前方内聚力区的面力为

$$\sigma_y - i\tau_{xy} = \sigma_y^{(0)} - i\tau_{xy}^{(0)} + \frac{2\mu}{(\kappa + 1)\pi i} \int_0^R \frac{\sqrt{\tau} b(\tau)}{\sqrt{x(x - \tau)}} d\tau \quad (9)$$

式中:  $\sigma_y^{(0)}, \tau_{xy}^{(0)}$  为外界载荷产生的奇性应力场。

方程 (9) 可改写为

$$\begin{aligned} \frac{2\mu}{(\kappa + 1)\pi} \int_0^R \frac{\sqrt{\tau} b_x(\tau)}{x - \tau} d\tau &= \sqrt{x} [\tau_{xy} - \tau_{xy}^{(0)}] \\ \frac{2\mu}{(\kappa + 1)\pi} \int_0^R \frac{\sqrt{\tau} b_y(\tau)}{x - \tau} d\tau &= \sqrt{x} [\sigma_y - \sigma_y^{(0)}] \end{aligned} \quad (10)$$

对于纯 II 型裂纹, 我们有  $\sigma_y = \sigma_y^{(0)} = b_y = 0$ , 引入无量纲:

$$\begin{aligned} t &= x/R, \quad s = \tau/R \\ \text{令} \quad F(t) &= \sqrt{t} b_x(x) \frac{\mu}{\kappa + 1} \end{aligned} \quad (11a)$$

$$g(t) = \sqrt{t} [\tau_{xy} - \tau_{xy}^{(0)}] \quad (11b)$$

由方程 (10) 导得

$$-\frac{2}{\pi} \int_0^1 \frac{F(s) ds}{s - t} = g(t) \quad (12)$$

引入变量转换  $t = \frac{1}{2}(1 + \cos\theta)$ ,  $F(t)$  可表示为下述正弦级数:

$$F(t) = \frac{1}{2} \cdot \sum_{m=1}^{\infty} \alpha_m \sin m\theta, \quad t = \frac{1}{2}(1 + \cos\theta), \quad 0 \leq \theta \leq \pi \quad (13)$$

又可改写为

$$F(t) = \frac{1}{2} \sqrt{1 - \eta^2} \cdot \sum_{m=1}^{\infty} \alpha_m U_m(\eta) \quad (14)$$

式中:  $U_m(\eta)$  是第一类切比雪夫多项式

$$U_m(\eta) = \frac{\sin m\theta}{\sin\theta}, \quad m = 1, 2, \dots, \quad \eta = \cos\theta, \quad t = \frac{1}{2}(1 + \eta) \quad (15)$$

将 (14) 式代入 (12) 式, 并利用下述公式:

$$\frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1 - \xi^2} U_m(\xi) d\xi}{\xi - \eta} = \begin{cases} -T_m(\eta), & -1 \leq \eta \leq 1 \\ -\left[\eta - \sqrt{\eta^2 - 1}\right]^m, & \eta > 1 \end{cases} \quad (16)$$

不难得到

$$g(t) = \sum_{m=1}^{\infty} \alpha_m \cos m\theta \tag{17}$$

式中:  $T_m(\eta)$ 是第一类切比雪夫多项式

$$\begin{cases} T_m(\eta) = \cos m\theta \\ \eta = \cos\theta \end{cases} \tag{18}$$

剪切位移可表示为

$$\delta_x = \int_x^R b_x(\tau) d\tau \tag{19}$$

利用方程 (11)、(13), 可推得

$$\frac{\mu}{(\kappa+1)} \delta_x = \frac{R}{4} \cdot \sum_{m=1}^{\infty} \alpha_m V_m(\theta) \tag{20}$$

$$V_m(\theta) = \frac{\sin\left(m - \frac{1}{2}\right)\theta}{m - \frac{1}{2}} - \frac{\sin\left(m + \frac{1}{2}\right)\theta}{m + \frac{1}{2}} \tag{21}$$

裂端奇性场可表示为

$$\sigma_y^{(0)} + i\tau_{xy}^{(0)} = \frac{K}{\sqrt{2\pi r}} \tag{22}$$

将 (22) 式代入 (11b) 式, 导得

$$\tau_{xy} = \frac{1}{\sqrt{r}} \left[ g(r) + \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi R}} \right] \tag{23}$$

由方程 (17) 得知

$$\int_0^\pi g(t) d\theta = 0$$

将 (23) 式代入上式, 得

$$\frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi R}} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \sqrt{t} \tau_{xy} d\theta = \frac{1}{\pi\sqrt{R}} \int_0^R \frac{\tau_{xy}}{\sqrt{R-x}} dx \tag{24}$$

式(24)即是著名的 Barenblatt 公式。

类似地可以推得纯 I 型及复合型裂纹的基本公式。限于篇幅, 不一一列出。

### 3 计算方法

取 $\{\alpha_m\}$ 作为基本未知量, 公式(13)、(17)中的无穷级数, 可用截断的有限级数来表示。内聚力区离散为  $M$  个元素, 相应的节点由下式给出:

$$x_i = \frac{1}{2} R \left[ 1 + \cos\left(\frac{(i-1)\pi}{M}\right) \right] \tag{25}$$

在  $M$  个结点上, 内聚力公式 (1) 必需得到满足, 由此得到下述非线性代数方程:

$$\sum_{k=1}^M a_{ik} \alpha_k - \tau_{\max} \sin\left(2\pi \frac{\Delta_{xi}}{b}\right) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, M \tag{26}$$

$$a_{ik} = \frac{[\cos(k\theta_i) - \cos(k\pi)]}{\sqrt{t_i}}, \quad \theta_i = \frac{(i-1)\pi}{M} \tag{27}$$

式中:  $\Delta_{xi}$  是第  $i$  个结点处的剪切位移。

方程 (27) 用 Newton-Raphson 方法求解。在迭代了 5~10 次之后, 可得到收敛的结果。本文大部分计算结果给出了内聚力区域内应力场的 5 位有效数字的数值 (以应力场前后两次迭代结果前 5 位有效数字完全相同作为收敛准则)。

在本文计算中,  $R$  是控制参量,  $R$  的增加, 表征应力强度因子  $K$  的增加。

### 4 位错成核计算结果

材料参数取为:  $\frac{h}{b} = 1, \frac{L}{b} = 0.2, \frac{\tau_0}{\mu} = 0.01, \frac{\sigma_0}{E} = 0.008, \nu = 0.3, \frac{\tau_{max}}{\mu} = 0.159, \frac{\sigma_0}{E} = 0.0766,$

$M$  取为 180。

图 3 给出了不同纯剪载荷下, 滑错位分布图。当能量释放率  $G = 1.0004\gamma_{us}$  时, 裂纹顶端的滑错位  $\delta_x = b/2$ 。此时, 在裂纹顶端形成了一个完整的 Peierls 晶体位错。图 3 上的实线表示本文计算结果, 而虚线给出了 Beltz 和 Rice<sup>[6]</sup> 的计算结果。从图 3 看出, 本文的结果与 Beltz 和 Rice<sup>[6]</sup> 的结果非常一致。当  $G/\gamma_{us} < 0.9$  时, 我们的结果与 Beltz 和 Rice<sup>[6]</sup> 的结果完全重合, 当  $G/\gamma_{us} > 0.9$ , 两者有非常细微的差别。这是由于本文对 Rice<sup>[4]</sup> 的模型作了一些修正。

内聚力区的剪应力  $\tau_{xy}$  分布绘在图 4。剪应力  $\tau_{xy}$  的峰值随着载荷增加而向着裂纹前方移动。

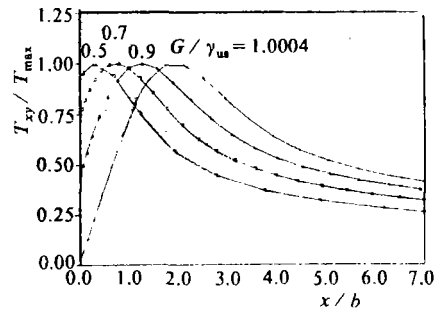
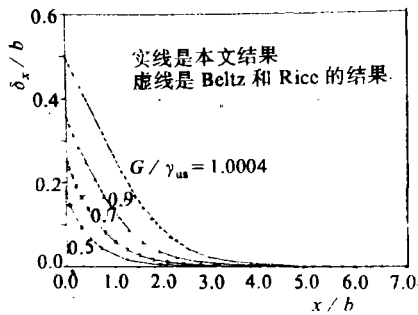


图 3 纯 II 型裂纹在不同剪切载荷下, 滑错位分布

图 4 不同纯剪切载荷下剪应力在内聚力区的分布

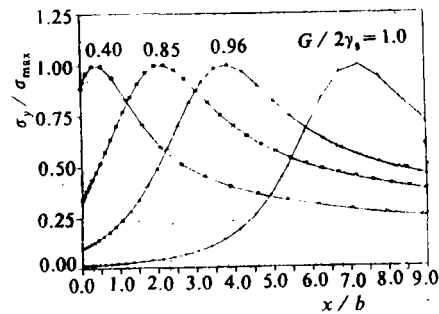
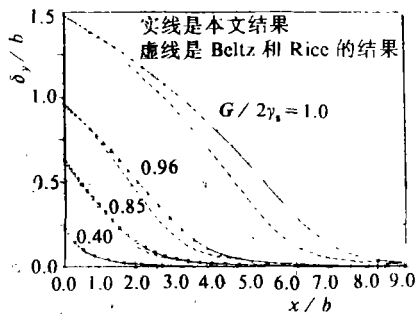


图 5 纯 I 型裂纹在不同拉伸载荷下, 张开位移分布

图 6 纯 I 型裂纹在不同拉伸载荷下, 法向应力沿粘脱区分布

图 5 给出纯 I 型裂纹张开位移的分布图。实线表示本文结果, 虚线代表 Beltz 和 Rice<sup>[6]</sup> 的计算结果, 当  $G/2\gamma_s < 0.4$  时, 两者结果完全一致。但是随着载荷增加, 两者的偏

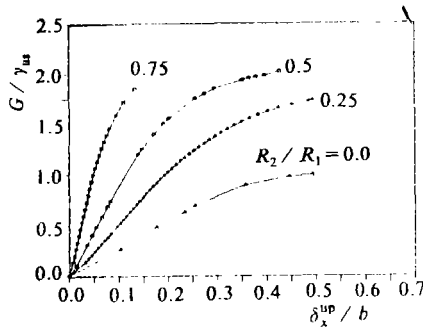


图7 对于不同比值  $R_2/R_1$  的复合型裂纹, 能量释放率  $G$  与裂纹顶端滑错位移的关系

在内聚力区之外, 滑错位移  $\delta_x$  恒为零。  $R_2$  表示关于张开位移的粘脱区的尺寸, 在粘脱区之外, 滑移面两侧的张开位移为零。对于纯II型裂纹,  $R_2=0, R_1=R$ 。

### 5 位错发射计算结果

随着内聚力区尺寸的增加, 在裂纹顶端成核的位错, 将从裂端发射。图8画出了纯II型裂纹位错发射之后, 滑错位移  $\delta_x$  的分布图。从中可以清楚地看出, 晶体位错的中心位置, 随着  $R_1$  的增加, 不断向裂纹前方移动。图8中三条曲线分别对应  $R_1/b=262.5, 302.5, 362.5$ 。而相应的外加的无量纲应力强度因子  $\frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi b} \tau_0} = 13.7, 4.98$  和  $2.65$ 。这说明当晶体位

错的中心位置距离裂纹顶端比较近的时候, 远场的应力强度因子不断减小。为了维持远场的应力强度因子水平, 晶体位错必须急速远离裂纹顶端。

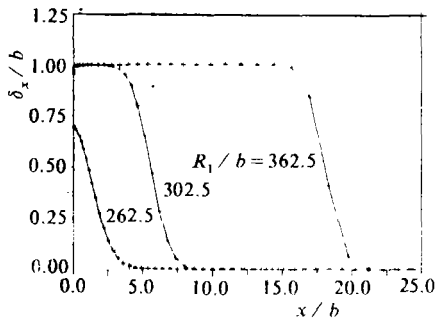


图8 纯II型裂纹, 位错发射后, 滑错位移分布图

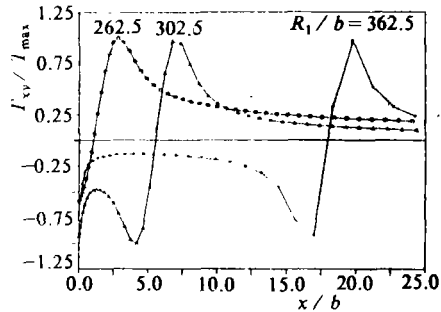


图9 纯II型裂纹, 位错发射后, 剪应力在内聚力区内的分布

图8的结果还清楚地表明, 在已发散位错与裂纹顶端之间, 存在着一个“理想”晶体区域。在这个区域内, 滑移面两侧晶体正好滑移了一个 Burgers 矢量。

位错发射后, 应力场  $\tau_{xy}$  发生了巨大变化。从图9上看出, 在晶体位错中心位置附近, 应力场变化非常剧烈。而在裂纹顶端附近, 应力场  $\tau_{xy}$  为负值, 这是由于已发射位错的屏蔽效应过强造成的。

差也逐步增加, 这是由于在我们的计算中, 初始屈服应力  $\sigma_0$  取得偏高 ( $\sigma_0/\sigma_{max} = 0.1044$ )。本文的修正模型与 Rice 的模型的差别也就大些, 因此, 两者的计算结果有些差别。

法向正应力  $\sigma_y$  在内聚力区内的分布绘在图6上。随着载荷的增加,  $\sigma_y$  的峰值也向着裂纹前方移动。

图7表示在给定的比值  $R_1/R_2$  下, 复合型裂纹顶端滑错位移与能量释放率的关系。这里  $R_1$  表示关于滑错位移的内聚力区的尺寸,  $R_2$  表示关于张开位移的粘脱区的尺寸, 在粘脱区之外, 滑移面两侧的张开位移为零。对于纯II型裂纹,  $R_2=0, R_1=R$ 。

## 参 考 文 献

- [1] Rice J R, Thomson R M. *Phil Mag*, 1974, 29: 73
- [2] Ohr S M. *Scripta Metall*, 1986, 20: 1465
- [3] Schoeck G. *Phil Mag A*, 1991, 63: 111
- [4] Rice J R. *J Mech Phys Solids*, 1992, 40: 239
- [5] Rice J R, Beltz G E, Sun Y. In: Argon A S, ed. *Topics in Fracture and Fatigue*. Springer Verlag, 1992
- [6] Beltz G E, Rice J R. In: Terry C L, et al, eds. *Modelling the Deformation of Crystalline Solids*, 1991, 457
- [7] Muskhelishvili N L. *Some basic problems of mathematical theory of elasticity*, P. Noordhoff, 1958
- [8] Loo K K. *J Appl Mech*, 1978, 45: 797

## PEIERLS' FRAME AND THE BEHAVIOR OF DISLOCATION AROUND THE TIP OF CRACK

*Wang Ziqiang*

(The Research Institute of Mechanics, China Academy of Science)

-Abstract-

This paper presents a strict mathematical analysis for the problem of the nucleation and the radiation of the dislocation at crack tip, under the Peierls' frame. On the basis of the revised Rice's hypothesis, the author established a new system of governing equations, in which the stress field and the field of dislocation density are expressed respectively as the first and second Chebyshev polynomials series and the opening displacement and the slip displacement of dislocation may be expressed with trigonometrical series. And, by the discrete method, these governing equations may be reduced to a system of nonlinear algebraic equations solved by the Newton-Raphson's method. The solutions of pure shear, pure tension and shear and tension combined far fields are obtained. The computational results clearly show the processes of nucleation and the radiation of the dislocation around the tip of the crack.

**Keywords:** Peierls' frame, The tip of crack, Behavior of dislocation.